

Détermination des forces à partir d'un potentiel en dynamique moléculaire (Note)

BERNARD MONASSE
Mines-ParisTech, Cemef
bernard.monasse@mines-paristech.fr

FRÉDÉRIC BOUSSINOT
Mines-ParisTech, Cemef
frederic.boussinot@mines-paristech.fr

November 5, 2013

Abstract

Dans le cadre de la dynamique moléculaire, on définit les forces appliquées aux atomes sous forme vectorielle. Ces forces dérivent de potentiels de liaison ou d'interaction et décrivent le comportement des liaisons, des angles de valence, des angles de torsion et des interactions de Lennard-Jones. Ces définitions sont classiques ; par contre, leur implémentation dans un code de dynamique moléculaire qui respecte les conditions d'équilibre mécanique local n'est généralement pas décrite. Le calcul des forces et leur implémentation font l'objet de cette note. Ce rapport entre dans le cadre du développement d'un système de dynamique moléculaire multi-échelle actuellement en cours de réalisation.

Mots clé. Dynamique moléculaire ; Champ de forces ; Potentiels ; Forces.

1 Introduction

La simulation numérique à l'échelle des atomes consiste à prédire l'état des systèmes, à partir d'un nombre limité de principes physiques, et les propriétés qui en découlent, à l'aide d'une résolution numérique et d'une implantation informatique. En dynamique moléculaire (DM) [1] les systèmes sont des molécules organiques, des atomes métalliques ou des ions. Nous nous concentrerons sur les molécules organiques, mais les explications données sont aisément transposables aux autres systèmes. Les molécules étant formées d'atomes, l'objectif est de déterminer l'évolution de leur géométrie et de leur énergie au cours du temps.

À la base de la DM on trouve la physique classique (newtownienne), avec l'équation fondamentale :

$$\vec{F} = m \vec{a} \quad (1)$$

où \vec{F} est la force subie par une particule de masse m et \vec{a} son accélération (la dérivée seconde de la variation de sa position, par rapport au temps).

Un champ de force est constitué de diverses composantes, appelées potentiels (liaisons, angles de valence, angles dièdres, van der Waals, électrostatique, ...). La forme analytique de chacune de ces composantes ainsi que les paramètres les caractérisant définissent un champ de force particulier. Les composants élémentaires utilisés pour modéliser les molécules sont les suivants :

- les atomes, avec 6 degrés de liberté (position et vitesse);
- les liaisons (*bonds*) qui lient deux atomes a, b (dits alors *liés*) au sein d'une molécule; la liaison directionnelle entre deux atomes tend à maintenir constante la distance ab .
- les angles de valence (*valence angles*) sont définis par l'angle entre deux liaisons adjacentes ba et bc au sein d'une molécule; l'angle de valence tend à maintenir à une valeur fixe l'angle \widehat{abc} . Il faut donc intervenir la connaissance de la position de trois atomes.
- les angles de torsion (*dihedral angles*) sont définis à partir des positions de quatre atomes a, b, c, d consécutifs au sein d'une molécule; a est lié à b , b à c et c à d ; l'angle de torsion tend à privilégier des angles particuliers entre les plans abc et bcd . Ce sont les positions d'équilibre définies par le potentiel. Dans la plupart des cas, ils correspondent à des conformations *Trans* (angle de 180°), *Gauche* (60°) ou *Gauche'* (-60°).
- les interactions de van der Waals s'appliquent entre deux atomes non reliés par une chaîne de moins de trois (ou quatre) liaisons, ou bien n'appartenant pas à une même molécule. Ce sont des potentiels de paire.

Tous ces potentiels dépendent de la nature des atomes et sont paramétrés pour un champ de forces donné. Les modélisations moléculaires peuvent aussi prendre en compte les interactions électrostatiques (loi de Coulomb) qui sont également des potentiels de paire, comme les potentiels de van der Waals; leur implémentation sera similaire à celle des potentiels de van der Waals, avec cependant une dépendance en distance différente.

Les forces intra-moléculaires (liaisons, valence, dièdres) ainsi que les forces inter-moléculaires (van der Waals) sont conservatives : le travail entre deux points est indépendant du chemin suivi. Elles peuvent donc être définies comme des dérivées de champs scalaires, appelés *potentiels*. On a alors :

$$\vec{F}(\mathbf{r}) = -\vec{\nabla}\mathcal{U}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

où \mathbf{r} désigne les coordonnées du point sur lequel la force $\vec{F}(\mathbf{r})$ s'applique et \mathcal{U} est le potentiel dont la force dérive.

Le travail présenté ici est une partie du développement d'un système de DM actuellement en cours de réalisation, avec lequel les équations et leur mise en œuvre ont été testées.

Structure du texte

Les liaisons sont considérées dans la section 2, les angles de valence dans la section 3, les angles de torsion dans la section 4, et enfin les potentiels de Lennard-Jones dans la section 5. Un résumé des forces est donné dans la section 6. La section 7 conclut le texte. Une annexe définit les notations utilisées dans le texte.

2 Liaisons

Une liaison (*bond*) modélise un partage d'électrons entre deux atomes, engendrant une force entre eux-ci. Cette force est la dérivée du potentiel de liaison défini entre les deux atomes. La figure 2.1 représente une force (attractive) engendrée entre deux atomes liés a et b .

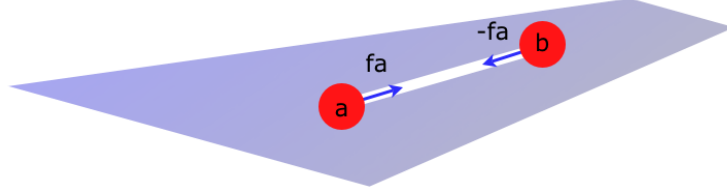


Figure 2.1: Liaison attractive entre deux atomes liés

Un *potentiel harmonique de liaison* est un champ scalaire \mathcal{U} définissant l'énergie (potentielle) entre deux atomes placés à distance r comme :

$$\mathcal{U}(r) = k(r - r_0)^2 \quad (3)$$

où k est la raideur de la liaison et r_0 est la distance d'équilibre (distance à laquelle la force entre les deux atomes est nulle). On a donc :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(r)}{\partial r} = 2k(r - r_0) \quad (4)$$

La dérivée partielle de \mathcal{U} par rapport à la position r_a de a est :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(r)}{\partial r_a} = \frac{\partial \mathcal{U}(r)}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial r_a}. \quad (5)$$

Or :

$$\frac{\partial r}{\partial r_a} = 1 \quad (6)$$

On a donc :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(r)}{\partial r_a} = 2k(r - r_0) \quad (7)$$

Soient deux atomes a et b , et $\vec{u} = \text{norm}(\vec{ba})$ la normalisation du vecteur \vec{ba} . La force engendrée sur l'atome a est :

$$\vec{f}_a = -\frac{\partial \mathcal{U}(r)}{\partial r_a} \cdot \vec{u} = -2k(r - r_0) \cdot \vec{u} \quad (8)$$

et celle sur b est l'opposée, du fait du principe de l'action et de la réaction :

$$\vec{f}_b = -\vec{f}_a \quad (9)$$

Ainsi, si $r > r_0$, la force sur a est un vecteur de direction opposée à \vec{u} et tend donc à rapprocher a de b (force attractive), tandis qu'elle tend à les éloigner (force répulsive) lorsque $r < r_0$.

3 Angles de valence

Les angles de valence tendent à maintenir constant l'angle entre trois atomes a , b et c tels que a soit lié à b et b à c , comme sur la figure 3.1.

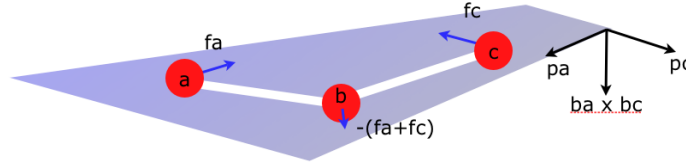


Figure 3.1: Angle de valence

Les forces appliquées aux trois atomes appartiennent toujours au plan qu'ils définissent.

Un *potentiel harmonique de valence* est un champ scalaire \mathcal{U} qui définit l'énergie potentielle d'une configuration d'atomes formant un angle de valence θ par :

$$\mathcal{U}(\theta) = k(\theta - \theta_0)^2 \quad (10)$$

où k est la raideur de l'angle et θ_0 est l'angle d'équilibre (celui pour lequel l'énergie est nulle). La dérivée partielle de \mathcal{U} par rapport à l'angle θ est donc :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial \theta} = 2k(\theta - \theta_0) \quad (11)$$

La dérivée partielle de \mathcal{U} par rapport à la position r_a de a est :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial r_a} = \frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r_a} \quad (12)$$

c'est-à-dire :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial r_a} = 2k(\theta - \theta_0) \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r_a} \quad (13)$$

Puisque a décrit le cercle de rayon $|ab|$, centré en b , on a¹ :

$$\frac{\partial \theta}{\partial r_a} = \frac{1}{|ab|} \quad (14)$$

Soit \vec{p}_a le vecteur normalisé du plan abc , orthogonal à \vec{ba} :

$$\vec{p}_a = \text{norm}(\vec{ba} \times (\vec{ba} \times \vec{bc})) \quad (15)$$

La force appliquée en a est alors :

$$\vec{f}_a = -\frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial r_a} \cdot \vec{p}_a = -2k(\theta - \theta_0)/|ab| \cdot \vec{p}_a \quad (16)$$

De même, la force appliquée en c est :

$$\vec{f}_c = -2k(\theta - \theta_0)/|bc| \cdot \vec{p}_c \quad (17)$$

où \vec{p}_c est le vecteur normalisé du plan abc , orthogonal à \vec{cb} :

$$\vec{p}_c = \text{norm}(\vec{cb} \times (\vec{ba} \times \vec{bc})) \quad (18)$$

La somme des forces appliquées doit être nulle :

$$\vec{f}_a + \vec{f}_b + \vec{f}_c = 0$$

Donc, la force appliquée à b est :

$$\vec{f}_b = -\vec{f}_a - \vec{f}_c \quad (19)$$

De plus, les deux moments exercés sur b par \vec{f}_a et \vec{f}_c sont inverses puisque :

$$\vec{ab} \times \vec{f}_a = -\vec{cb} \times \vec{f}_c \quad (20)$$

Aucune rotation autour de b n'est donc produite par \vec{f}_a et \vec{f}_c .

4 Angles de torsion

Dans le champ de forces OPLS [2], comme dans de nombreux autres champs de forces, les potentiels des angles de torsion ont une forme en “cosinus triple”. Cela signifie que le potentiel \mathcal{U} d'un angle de torsion θ est donné par :

$$\mathcal{U}(\theta) = 0.5[A_1(1 + \cos(\theta)) + A_2(1 - \cos(2\theta)) + A_3(1 + \cos(3\theta)) + A_4] \quad (21)$$

La dérivée partielle du potentiel de l'angle de torsion par rapport à la position r_a de a est :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial r_a} = \frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial r_a} \quad (22)$$

¹La longueur d'un arc de cercle est égale au produit du rayon par l'angle (défini en radians) qui sous-tend l'arc.

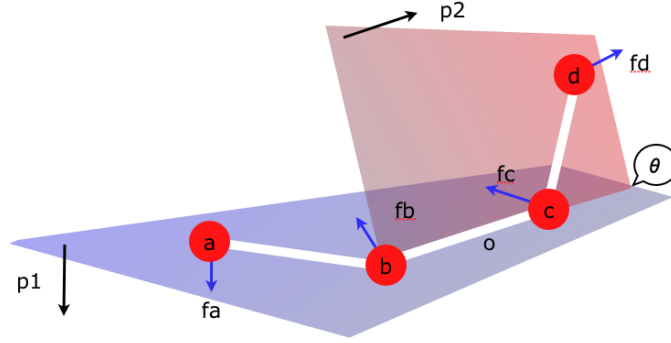


Figure 4.1: Angle de torsion θ

La dérivée partielle du potentiel par rapport à l'angle θ est :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial \theta} = 0.5(-A_1 \sin(\theta) + 2A_2 \sin(2\theta) - 3A_3 \sin(3\theta)) \quad (23)$$

$$= -0.5(A_1 \sin(\theta) - 2A_2 \sin(2\theta) + 3A_3 \sin(3\theta)) \quad (24)$$

4.1 Forces en a et d

Appelons θ_1 l'angle \widehat{abc} . L'atome a tourne autour de la direction bc , sur un cercle de rayon $|ab| \sin(\theta_1)$. La dérivée partielle de θ par rapport à la position de a est :

$$\frac{\partial \theta}{\partial r_a} = \frac{1}{|ab| \sin(\theta_1)} \quad (25)$$

On a donc :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial r_a} = \frac{-0.5}{|ab| \sin(\theta_1)} (A_1 \sin(\theta) - 2A_2 \sin(2\theta) + 3A_3 \sin(3\theta)) \quad (26)$$

De même, pour l'atome d , en notant θ_2 l'angle \widehat{bcd} :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(\theta)}{\partial r_d} = \frac{-0.5}{|cd| \sin(\theta_2)} (A_1 \sin(\theta) - 2A_2 \sin(2\theta) + 3A_3 \sin(3\theta)) \quad (27)$$

Soit \vec{p}_1 le vecteur unitaire orthogonal au plan abc et \vec{p}_2 le vecteur unitaire orthogonal au plan bcd (l'angle entre \vec{p}_1 et \vec{p}_2 est θ) :

$$\vec{p}_1 = \text{norm}(\vec{ba} \times \vec{bc}) \quad (28)$$

$$\vec{p}_2 = \text{norm}(\vec{cd} \times \vec{cb}) \quad (29)$$

La force appliquée en a est :

$$\vec{f}_a = \frac{0.5}{|ab| \sin(\theta_1)} (A_1 \sin(\theta) - 2A_2 \sin(2\theta) + 3A_3 \sin(3\theta)) \cdot \vec{p}_1 \quad (30)$$

De même, la force appliquée en d est :

$$\vec{f}_d = \frac{0.5}{|cd|\sin(\theta_2)}(A_1\sin(\theta) - 2A_2\sin(2\theta) + 3A_3\sin(3\theta)).\vec{p}_2 \quad (31)$$

4.2 Forces en b et c

Il faut maintenant déterminer les forces \vec{f}_b et \vec{f}_c à appliquer à b et c . Les conditions d'équilibre impliquent deux contraintes : (A) la somme des forces doit être nulle :

$$\vec{f}_a + \vec{f}_b + \vec{f}_c + \vec{f}_d = 0 \quad (32)$$

et (B) la somme des moments des couples exercés doit également être nulle². En appelant o le centre de la liaison bc , ceci implique :

$$\vec{oa} \times \vec{f}_a + \vec{od} \times \vec{f}_d + \vec{ob} \times \vec{f}_b + \vec{oc} \times \vec{f}_c = 0 \quad (33)$$

De (33), il résulte :

$$(\vec{ob} + \vec{ba}) \times \vec{f}_a + (\vec{oc} + \vec{cd}) \times \vec{f}_d + \vec{ob} \times \vec{f}_b + \vec{oc} \times \vec{f}_c = 0 \quad (34)$$

et :

$$(-\vec{oc} + \vec{ba}) \times \vec{f}_a + (\vec{oc} + \vec{cd}) \times \vec{f}_d - \vec{oc} \times \vec{f}_b + \vec{oc} \times \vec{f}_c = 0 \quad (35)$$

d'où :

$$\vec{oc} \times (-\vec{f}_a + \vec{f}_d - \vec{f}_b + \vec{f}_c) + \vec{ba} \times \vec{f}_a + \vec{cd} \times \vec{f}_d = 0 \quad (36)$$

De (32), il résulte :

$$-\vec{f}_a + \vec{f}_d - \vec{f}_b + \vec{f}_c = 2(\vec{f}_d + \vec{f}_c) \quad (37)$$

Par substitution de (37) dans (36), on a :

$$\vec{oc} \times (2(\vec{f}_d + \vec{f}_c)) + \vec{ba} \times \vec{f}_a + \vec{cd} \times \vec{f}_d = 0 \quad (38)$$

donc :

$$2\vec{oc} \times \vec{f}_d + 2\vec{oc} \times \vec{f}_c + \vec{ba} \times \vec{f}_a + \vec{cd} \times \vec{f}_d = 0 \quad (39)$$

d'où :

$$2\vec{oc} \times \vec{f}_c = -2\vec{oc} \times \vec{f}_d - \vec{cd} \times \vec{f}_d - \vec{ba} \times \vec{f}_a \quad (40)$$

donc :

$$\vec{oc} \times \vec{f}_c = -(\vec{oc} \times \vec{f}_d + 0.5\vec{cd} \times \vec{f}_d + 0.5\vec{ba} \times \vec{f}_a) \quad (41)$$

Posons :

$$\vec{cpl}_c = -(\vec{oc} \times \vec{f}_d + 0.5\vec{cd} \times \vec{f}_d + 0.5\vec{ba} \times \vec{f}_a) \quad (42)$$

L'équation $\vec{oc} \times \vec{x} = \vec{cpl}_c$ a une infinité de solutions en \vec{x} , donnant le même couple \vec{cpl}_c en c . Elles ont toutes la même composante perpendiculaire à \vec{oc} .

² On ne peut définir simplement $\vec{f}_b = -\vec{f}_a$ et $\vec{f}_c = -\vec{f}_d$ car on introduit alors des couples qui provoquent un accroissement d'énergie potentielle.

Nous choisissons simplement pour solution la force perpendiculaire à \overrightarrow{oc} définie par :

$$\overrightarrow{f_c} = (1/|oc|^2)\overrightarrow{cpl_c} \times \overrightarrow{oc} \quad (43)$$

L'équation (41) est bien vérifiée car :

$$\overrightarrow{oc} \times \overrightarrow{f_c} = (1/|oc|^2)\overrightarrow{oc} \times (\overrightarrow{cpl_c} \times \overrightarrow{oc}) \quad (44)$$

donc³ :

$$\overrightarrow{oc} \times \overrightarrow{f_c} = (1/|oc|^2)|oc|^2\overrightarrow{cpl_c} = \overrightarrow{cpl_c} \quad (45)$$

La valeur de $\overrightarrow{f_b}$ peut finalement être déduite de l'équation (32) d'équilibre des forces :

$$\overrightarrow{f_b} = -\overrightarrow{f_a} - \overrightarrow{f_c} - \overrightarrow{f_d} \quad (46)$$

5 Potentiels de Lennard-Jones

Un potentiel de Lennard-Jones (LJ) $\mathcal{U}(r)$ entre deux atomes à distance r peut être défini par :

$$\mathcal{U}(r) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right] \quad (47)$$

Dans cette définition, le paramètre σ est la distance à laquelle le potentiel est nul et le paramètre ϵ est la profondeur du potentiel (minimum de l'énergie).

En posant $A = \sigma^{12}$ et $B = \sigma^6$, l'équation (47) s'écrit :

$$\mathcal{U}(r) = 4\epsilon\left(\frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}\right) \quad (48)$$

La dérivée partielle de \mathcal{U} par rapport à la distance est donc :

$$\frac{\partial \mathcal{U}(r)}{\partial r} = 4\epsilon\left(-12\frac{A}{r^{13}} + 6\frac{B}{r^7}\right) \quad (49)$$

$$= 24\epsilon\left(-2\frac{A}{r^{13}} + \frac{B}{r^7}\right) \quad (50)$$

$$= \frac{24\epsilon}{r}\left(-2\frac{A}{r^{12}} + \frac{B}{r^6}\right) \quad (51)$$

$$= -\frac{24\epsilon}{r}\left(2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right) \quad (52)$$

Soient deux atomes a et b . La force engendrée sur l'atome a est :

$$\overrightarrow{f_a} = \frac{24\epsilon}{r}\left(2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right) \cdot \overrightarrow{u} \quad (53)$$

où \overrightarrow{u} est la normalisation de \overrightarrow{ba} . Du principe de l'action et de la réaction, on déduit que la force sur b est l'opposée de celle sur a :

$$\overrightarrow{f_b} = -\overrightarrow{f_a} \quad (54)$$

³ Si $u \perp v$, alors $u \times (v \times u) = |u|^2 v$.

6 Résumé

Les forces définies précédemment sont résumées dans le tableau suivant :

Liaison ab	8	$\vec{f}_a = -2k(r - r_0) \cdot \vec{u}$
	9	$\vec{f}_b = -\vec{f}_a$
Valence abc	16	$\vec{f}_a = -2k(\theta - \theta_0)/ ab \cdot \vec{p}_a$
	19	$\vec{f}_b = -\vec{f}_a - \vec{f}_c$
	17	$\vec{f}_c = -2k(\theta - \theta_0)/ bc \cdot \vec{p}_c$
Torsion $abcd$	30	$\vec{f}_a = \frac{0.5}{ ab \sin(\theta_1)} (A_1 \sin(\theta) - 2A_2 \sin(2\theta) + 3A_3 \sin(3\theta)) \cdot \vec{p}_1$
	46	$\vec{f}_b = -\vec{f}_a - \vec{f}_c - \vec{f}_d$
	43	$\vec{f}_c = (1/ oc ^2) \overrightarrow{cpl}_c \times \vec{oc}$
	31	$\vec{f}_d = \frac{0.5}{ cd \sin(\theta_2)} (A_1 \sin(\theta) - 2A_2 \sin(2\theta) + 3A_3 \sin(3\theta)) \cdot \vec{p}_2$
LJ ab	53	$\vec{f}_a = \frac{24\epsilon}{r} (2(\frac{\sigma}{r})^{12} - (\frac{\sigma}{r})^6) \cdot \vec{u}$
	54	$\vec{f}_b = -\vec{f}_a$

- dans l'équation 8, k est la constante de raideur de la liaison, r est la distance entre les atomes a et b , et r_0 est la distance d'équilibre, pour laquelle l'énergie s'annule. Le vecteur \vec{u} est défini par $\vec{u} = \text{norm}(\vec{ba})$.
- dans les équations 16 et 17, k est la constante de raideur de l'angle, θ est l'angle \widehat{abc} , et θ_0 est l'angle d'équilibre, pour lequel l'énergie s'annule. Dans 16, le vecteur \vec{p}_a est défini par $\vec{p}_a = \text{norm}(\vec{ba} \times (\vec{ba} \times \vec{bc}))$. Dans 17, le vecteur \vec{p}_c est défini par $\vec{p}_c = \text{norm}(\vec{cb} \times (\vec{ba} \times \vec{bc}))$.
- dans les équations 30 et 31, θ est l'angle de torsion, θ_1 est l'angle \widehat{abc} , θ_2 est l'angle \widehat{bcd} et A_1 , A_2 et A_3 sont les paramètres qui définissent la forme en 3-cosinus du dièdre. Le vecteur \vec{p}_1 est défini par $\vec{p}_1 = \text{norm}(\vec{ba} \times \vec{bc})$ et $\vec{p}_2 = \text{norm}(\vec{cd} \times \vec{cb})$. Dans 43, o est le milieu de bc et \overrightarrow{cpl}_c est défini par $\overrightarrow{cpl}_c = -(\vec{oc} \times \vec{f}_d + 0.5\vec{cd} \times \vec{f}_d + 0.5\vec{ba} \times \vec{f}_a)$.
- dans 53, σ est la distance à laquelle le potentiel est nul et ϵ est la profondeur du potentiel (minimum de l'énergie). Comme pour les liaisons, on a $\vec{u} = \text{norm}(\vec{ba})$.

7 Conclusion

Nous avons défini de façon entièrement vectorielle les forces s'appliquant sur les atomes, dans un système de DM. Aucune rotation ne résulte de l'application de ces forces, dont la somme des forces et la somme des couples sont toujours nulles. Ainsi, l'énergie totale des systèmes (énergie potentielle, plus énergie cinétique) est préservée.

References

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford, 1987.
- [2] W. Damm, A. Frontera, J. Tirado-Rives, and W.L. Jorgensen. OPLS All-atom Force Field for Carbohydrates. *J. Comput. Chem.*, 16(18):1955–1970, 1997.

A Notations

- Si a et b sont deux atomes, on note \overrightarrow{ab} le vecteur qui relie a à b et $|ab|$ la distance entre eux.
- Le vecteur nul est noté 0 .
- La longueur du vecteur \overrightarrow{u} est notée $||\overrightarrow{u}||$.
- La multiplication de \overrightarrow{u} par le scalaire n est noté $n.\overrightarrow{u}$, ou plus simplement $n\overrightarrow{u}$.
- Le produit vectoriel de \overrightarrow{u} et \overrightarrow{v} est noté $\overrightarrow{u} \times \overrightarrow{v}$.
- Le produit scalaire de \overrightarrow{u} et \overrightarrow{v} est noté $\overrightarrow{u} \bullet \overrightarrow{v}$.
- On note $\overrightarrow{u} \perp \overrightarrow{v}$ lorsque \overrightarrow{u} et \overrightarrow{v} sont orthogonaux ($\overrightarrow{u} \bullet \overrightarrow{v} = 0$).
- On note $norm(\overrightarrow{u})$ le vecteur normalisé de \overrightarrow{u} (même direction, mais longueur égale à 1) défini par $norm(\overrightarrow{u}) = (1/||\overrightarrow{u}||).\overrightarrow{u}$.
- Si a , b et c sont des atomes, on note \widehat{abc} l'angle formé par a , b et c .